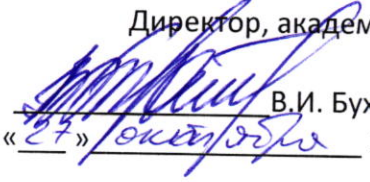


Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
«Федеральный исследовательский центр
«Институт катализа им. Г.К. Борескова
Сибирского отделения Российской академии наук»
(ИК СО РАН, Институт катализа СО РАН)

УТВЕРЖДАЮ
Директор, академик РАН

В.И. Бухтияров
«27» октября 2023 г.

Билеты к вступительному испытанию по научной специальности

1.4.4 «Физическая химия»

Билет 1

1. Химический потенциал электролита в растворе: активности электролитов, среднеионные величины и стандартные значения. Зависимость коэффициента активности от ионной силы по теории Дебая – Хюккеля.
2. Разветвленные цепные реакции. Нижний и верхний пределы самовоспламенения.
3. Двухатомные частицы: ионы и молекулы, состоящие из элементов I- и II-го периодов. σ - и π - связи. Энергетическая диаграмма молекулярных орбиталей. Правила заполнения молекулярных орбиталей электронами. Кратность (порядок) связи.

Билет 2

1. Химические переменные и число независимых реакций. Парциальные молярные величины компонентов. Химические потенциалы. Уравнения Гиббса-Дюгема.
2. Кинетическое описание реакций в открытых системах. Реакторы идеального вытеснения.
3. Диполь. Дипольный момент связи. Электроотрицательность атомов. Факторы, влияющие на дипольный момент молекулы.

Билет 3

1. Расчет термодинамических свойств идеальных газов из молекулярных констант. Статсумма смеси идеальных газов и статистический расчет констант равновесия химических реакций.
2. Теория активированного комплекса. Поверхность потенциальной энергии, координата реакции и переходное состояние. Условия применимости теории активированного комплекса.
3. Многоэлектронные атомы. Принцип Паули. Электронные конфигурации атомов и периодическая система элементов. Правило Хунда. Потенциал ионизации. Средство к электрону.

Билет 4

1. Реакции с участием конденсированных несмешанных фаз и идеальных газов. Учет неидеальности газовой фазы. Расчет констант равновесия. Расчет равновесного состава.
2. Неразветвленные цепные реакции. Выражение для средней длины цепи.
3. Двухэлектронные связи в многоатомных молекулах. Геометрическое строение молекул с точки зрения гибридизации и метода отталкивания валентных электронных пар.

Билет 5

1. Молекулярная статсумма для идеального газа. Поступательные, вращательные и колебательные степени свободы: энергетические спектры, статвеса уровней и статсуммы. Электронные состояния: учет статсуммы основного состояния и возбуждения.
2. Основные стадии цепных реакций. Диффузионный и кинетический контроль реакций линейного обрыва на стенках.
3. Газы, жидкости, твердые тела, кристаллы. Пространственная решетка. Простейшие ионные, атомные и металлические решетки (решетка хлористого натрия, алмаза, кубические, гранецентрированные и плотноупакованные решетки).

Билет 6

1. Изотерма химической реакции. Константа равновесия. Температурная зависимость константы равновесия — изобара Вант Гоффа. Смещение равновесия и принцип Ле Шателье – Брауна.
2. Кинетическое описание реакций в открытых системах. Реакторы полного перемешивания.
3. Поляризуемость молекул. Поляризация вещества. Диэлектрическая постоянная. Магнитный момент частиц. Парамагнетизм и диамагнетизм.

Билет 7

1. Идеальные растворы: совершенные и предельно разбавленные. Химические потенциалы компонентов идеальных растворов. Равновесие жидкость — пар: законы Рауля и Генри. Неидеальный раствор, активность. Химическое равновесие в растворах.
2. Кинетические уравнения и кинетические кривые для реакций 1-го, 2-го и 3-го порядков.
3. Теория кристаллического поля. Расщепление d-орбиталей в октаэдрическом и тетраэдрическом полях. Теория поля лигандов

Билет 8

1. Тепловые эффекты реакций. Энтальпии образования химических соединений. Стандартные состояния. Закон Гесса. Определение теплоты реакции из теплот сгорания. Расчет энтальпии реакций из термодинамических свойств веществ. Закон Кирхгофа.
2. Кинетика реакций в жидкости. Диффузионно контролируемые реакции. Клеточный эффект. Учет влияния среды.
3. Физическая сущность и информативность методов электронной спектроскопии.

Билет 9

1. Фундаментальные уравнения Гиббса. Термодинамические потенциалы и характеристические функции. Энтальпия, энергия Гельмгольца и энергия Гиббса. Направление самопроизвольного процесса и условия равновесия.
2. Автокаталитические реакции. Автоколебательные реакции. Схема Вольтера–Лотке.
3. Ван-дер-ваальсовы взаимодействия. Ковалентные и ван-дер-ваальсовы радиусы атомов. Модели молекул. Водородная связь. Взаимодействие ионов.

Билет 10

1. Термодинамические параметры. Теплота и работа. Внутренняя энергия и первое начало термодинамики. Уравнения состояния. Системы: открытые, закрытые и изолированные. Обратимые и необратимые процессы. Энтропия и второе начало термодинамики.
2. Основные стадии цепных реакций. Диффузионный и кинетический контроль реакций линейного обрыва на стенках.
3. Химическая связь в ионе H_2^+ . Молекулярные орбитали. Длина связи. Энергия связи.

Билет 11

1. Равновесия между двумя двухкомпонентными фазами. Фазовые диаграммы плавкости бинарных систем. Эвтектика.
2. Теория Линдемана.
3. Зонная теория твердых тел. Изоляторы и полупроводники. Уровень Ферми. Электронная и дырочная проводимость.

Билет 12

1. Гальванические элементы. ЭДС и потенциалы электродов. Окислительно-восстановительное равновесие. Уравнение Нернста. Типы электродов. Водородный электрод. Стандартные электродные потенциалы и условные термодинамические функции ионов.
2. Механизм химической реакции. Скорость химической реакции. Простые реакции. Закон действующих масс. Порядок реакции. Константа скорости химической реакции. Уравнение Аррениуса. Предэкспоненциальный множитель и энергия активации.
3. Атом водорода и водородоподобные частицы. Волновая функция и состояние электрона в атоме. Вероятность, плотность вероятности, радиальная функция распределения. Атомные орбитали. Квантовые числа и их физический смысл.

Билет 13

1. Изохорная и изобарная теплоемкости. Температурная зависимость термодинамических свойств вещества. Третье начало термодинамики и абсолютные значения энтропии веществ. Уравнения Гиббса–Гельмгольца.
2. Фотохимические реакции. Основной фотохимический закон. Закон Бугера-Ламберта-Бэра. Квантовый выход.
3. Рентгеноструктурный анализ, уравнение Вульфа-Брэгга. Дефекты в реальных кристаллах.

Билет 14

1. Равновесия между двумя двухкомпонентными фазами. Зависимость равновесных давлений от состава. Азеотропия. Фазовые диаграммы кипения бинарных систем.
2. Методы определения порядка реакции и кинетических констант из экспериментальных данных.
3. Физическая сущность и информативность методов колебательной и вращательной спектроскопии.

Билет 15

1. Статистическое обоснование термодинамики. Микросостояния макроскопических систем. Каноническое и микроканоническое распределение Гиббса. Статсумма и статвес. Связь между статсуммой и термодинамическими величинами.
2. Метод стационарных концентраций и квазиравновесное приближение. Лимитирующая стадия.
3. Электронная структура кристаллов. Модель свободных электронов в металлах. Металлическая проводимость.

Билет 16

1. Поверхностное натяжение. Изотерма адсорбции Гиббса. Теплота и энтропия адсорбции. Изотерма Лэнгмюра. Полимолекулярная адсорбция паров — изотерма БЭТ.
2. Нетермическое инициирование химических реакций. Сопряженные реакции и химическая индукция.
3. Элементарные частицы, образующие атомное ядро и атом. Основные характеристики атомного ядра. Элементы. Нуклиды и изотопы. Атомная единица массы и число Авогадро. Дефект массы. Радиоактивный распад. Ядерные реакции. Меченые атомы.

Билет 17

1. Правило фаз Гиббса. Фазовое равновесие в однокомпонентной системе, уравнение Клаузиуса–Клапейрона.
2. Методы расчета константы скорости реакций. Теория столкновений. Фактор двойных столкновений и стерический фактор.
3. Электромагнитное излучение и вещество. Сущность магнитной радиоспектроскопии. Электронный парамагнитный резонанс и свободные радикалы. Ядерный магнитный резонанс: химический сдвиг и расщепление сигналов.

Билет 18

1. Фазовые равновесия раствора с чистым компонентом. Мембранное равновесие и осмотическое давление.
2. Сложные реакции: обратимые, параллельные и последовательные.
3. Многоцентровые молекулярные орбитали. Электронодефицитные частицы. Сопряженные кратные связи.

Билет 19

1. Уравнения состояния и термодинамический потенциал идеального газа. Стандартный термодинамический потенциал реального газа и летучесть.
2. Автокаталитические реакции. Автоколебательные реакции. Схема Вольтера–Лотке.
3. Зонная теория твердых тел. Изоляторы и полупроводники. Уровень Ферми. Электронная и дырочная проводимость.

Билет 20

1. Фундаментальные уравнения Гиббса. Термодинамические потенциалы и характеристические функции. Энтальпия, энергия Гельмгольца и энергия Гиббса. Направление самопроизвольного процесса и условия равновесия.
2. Кинетика реакций в жидкости. Диффузионно контролируемые реакции. Клеточный эффект. Учет влияния среды.
3. Атом водорода и водородоподобные частицы. Волновая функция и состояние электрона в атоме. Вероятность, плотность вероятности, радиальная функция распределения. Атомные орбитали. Квантовые числа и их физический смысл.

Список литературы для подготовки вопросов из раздела «Строение вещества»:

1. Маррелл Дж., Кеттл С., Теддер Дж. Теория валентности. М.: Мир, 1968. :
2. Маррелл Дж., Кеттл С., Теддер Дж. Химическая связь. М.: Мир, 1980. :
3. Джаффе Г., Орчин М. Симметрия в химии. М.: Мир, 1977. :
4. Коулсон Ч. Валентность. М.: Мир, 1965. :
5. Грей Г. Электроны и химическая связь. М.: Мир, 1967. :
6. Стретвизор Э. Теория молекулярных орбиталей для химиков-органиков. М.: Мир, 1965. :
7. Краснов К.С. Молекулы и химическая связь. М.: Высш. шк., 1977. :
8. Картмелл Э., Фоулс Г.В.А. Валентность и строение молекул. М.: Химия, 1979. :
9. Киттель Ч. Элементарная физика твердого тела. М.: Наука, 1968. :
10. Пентин Ю.А., Вилков Л.В. Физические методы исследования в химии. М.: Мир, "Изд. АСТ", 2003. :
11. Драго Р. Физические методы в химии. Тт. 1 и 2. М.: Мир, 1981.

Список литературы для подготовки вопросов из раздела «Химическая термодинамика»:

1. Бажин Н.Б., Иванченко В.А., Пармон В.Н. Термодинамика для химиков. М.: Химия, 2000; Изд-е 2-е, М.: Колосс, 2004. :
2. Полторац О.М. Термодинамика в физической химии. М.: Высш. шк., 1991. :
3. Карапетьянц М.Х. Химическая термодинамика. М.: Химия, 1975. :
4. Еремин Е.Н. Основы химической термодинамики. М.: Высш. шк., 1978. :

5. Мюнстер Ф. Химическая термодинамика. М.: Мир, 1971. :
6. Хачкурузов Г.А. Основы общей и химической термодинамики. М.: Высш. шк., 1979. :
7. Смирнова Н.А. Методы статической термодинамики в физической химии. М.: Высш. шк., 1982. :
8. Смирнова Н.А. Молекулярные растворы. Л.: Химия, 1987.
9. Музыкантов В.С., Бажин Н.М., Пармон В.Н., Булгаков Н.Н., Иванченко В.А. Задачи по химической термодинамике. М.: Химия, 2001.

Список литературы для подготовки вопросов из раздела «Химическая кинетика»:

1. Замараев К.И. Курс химической кинетики. В 3-х частях. Новосибирск: НГУ, 2004.
2. Эмануэль Н. М., Кнорре Д. Г. Курс химической кинетики. М.: Высш. шк., 1984.
3. Денисов Е. Т. Кинетика гомогенных химических реакций. М.: Высш. шк., 1988.
4. Кондратьев В.Н., Никитин Е.Е. Кинетика и механизм газофазных реакций. М.: Наука, 1974.
5. Пурмаль А.П., А, Б, В ... химической кинетики. М.: ИКЦ "Академкнига", 2004.
6. Панченков Г. М., Лебедев В. П. Химическая кинетика и катализ. М.: Химия, 1974.
7. Лайдлер К. Кинетика органических реакций. М.: Мир, 1966.
8. Эйринг Г., Лин С.Г., Лин С.М. Основы химической кинетики. М.: "Мир", 1983
9. Бенсон С. Основы химической кинетики. М.: Мир, 1964.
10. Бенсон С. Термохимическая кинетика. М.: Мир, 1971.
11. Хоффман Р.В. Механизмы химических реакций. М.: Мир, 1979.
12. Сборник задач по химической кинетике и катализу. Под. ред. Савинова Е.Н., Пармона В.Н., Новосибирск: НГУ, 1997.